

С.В. Ольшевський¹
 О.А. Кушнір¹
 В.І. Литвиненко²
 О.П.Куликовський²

ВИКОРИСТАННЯ ЕНКОДЕРІВ ДЛЯ ПІДВИЩЕННЯ ТОЧНОСТІ ХРОМАТОГРАФІЇ В ТОНКОМУ ШАРІ

1. Київський національний університет імені Тараса Шевченка
 2. Херсонський національний технічний університет

Анотація.

В результаті проведення числових експериментів з використання автодекодера Variational AE для сегментації зображень хроматографічних треків показано, що така автоматизація дозволяє в 4 рази підвищити точність кількісного хімічного аналізу за допомогою хроматографії в тонкому шарі.

Ключові слова: хроматографія в тонкому шарі, сегментація, автодекодери

Вступ. Хроматографія в тонкому шарі (ТШХ) є важливим методом хімічного аналізу складних сумішей. Для отримання результатів, зазвичай, використовують органолептичний контроль, який внаслідок суб'єктивності людського фактору спричиняє зниження точності кількісного аналізу та значні витрати. Існуючі методи попередньої обробки зображень та порогової сегментації далеко не завжди є ефективними для задач розпізнавання треків, оскільки вони не враховують специфічні особливості таких зображень [1,2]. Застосування статичних значень порогу для алгоритмів сегментації вимагає постійного коригування ручних параметрів і може спричинити втрату важливої інформації або неминучу появу шумів. Робота присвячена, дослідженню ефективності використання автодекодерів для задач сегментації зображень в наведених умовах [3,4].

Метод. Для підвищення точності результатів кількісного аналізу ТШХ пропонується здійснити навчання автодекодера Variational AE на попередньо підготовленій збалансованій вибірці експериментальних хроматограф, після чого здійснювати сегментацію попередньо підготовленої досліджуваної хроматографи з подальшою цифровою редукцією шуму зображення і обчисленням площі хроматограми.

Експериментальні дослідження. Алгоритм використання автодекодера Variational AE для отримання результатів ТШХ-аналізу підвищеної точності наведено на рис. 1.

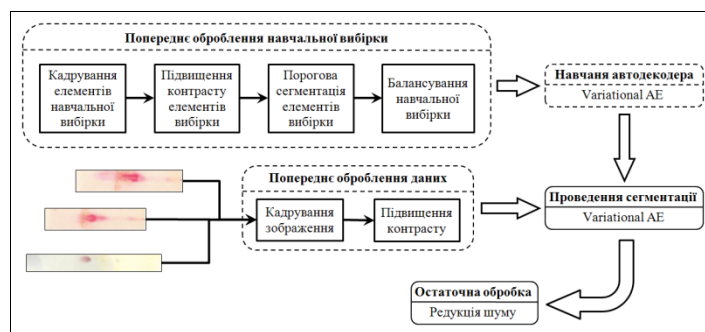


Рисунок 1 – Алгоритм підвищення точності ТШХ-аналізу з використанням автодекодера Variational AE

Для проведення числових експериментів брали вибірку з відсканованих зображень реальних хроматограм в тонкому шарі для 25 різних концентрацій досліджуваних речовин загальною кількістю 200 платівок місткість 5 треків кожна. Попередня підготовка зображень полягала в кадруванні кожного трека на однакові повздовжній і поперечний розміри з однаковою роздільною здатністю. Наступним кроком доводили контрастність кожного зображення до 0.7 одиниць за метрикою Майкельсона. Методом Оцу знаходили приблизну границю зображення хроматографічної плями, використану в процедурі балансування вибірки. Для балансування вибірки кожен підмножину треків з однаковими параметрами доводили до кількості 40 зображень. Якщо підмножина певного типу налічувала більше 40 зображень, надлишок елементів випадковим чином вилучали з масиву. Якщо підмножина певного типу мала менше

40 зображень, брак елементів доводили до необхідної кількості, випадковим чином деформуючи встановлену на попередньому кроці границю зображень із збереженням площі плями. Для навчання автодекодера використовували 75% підготовленої вибірки. На вхід навченого автодекодера подавали попередньо підготовлене зображення досліджуваного треку. Останнім кроком етапу остаточного оброблення треку обирали редукцію залишкового шуму зображення.

Результати автоматизованої сегментації за допомогою автодекодера наведені на рис. 2.

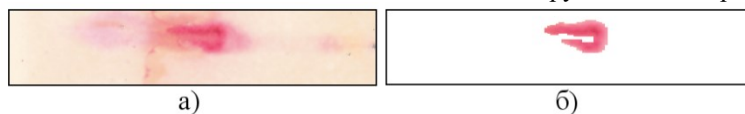


Рисунок 2 – Результати сегментації за допомогою автоенкодера Variational AE. Зображення а) відповідає вихідному треку, зображення б) – результату сегментації.

В таблиці 1 наведена оцінка якості результатів сегментації для різних метрик.

Таблиця 1. Оцінка якості сегментації в різних метриках.

Clustering Metrics			Pixel-wise Metrics	
Davies-Bouldin Index	Adjusted Rand Index	Adjusted Mutual Information	Adjusted Rand Index	Adjusted Mutual Information
2.0896	0.9988	0.9956	0.9848	0.9596

Висновки. В результаті проведених експериментів було показано що точність обчислення площі отриманої в результаті сегментації не менше 6%, в той час коли стандартна точність ТШХ становить 25%.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Wall, P.E., Society, R. and Firm, P. (2007). Thin-layer chromatography : a modern practical approach. Cambridge: Royal Society Of Chemistry.
2. Anubha, K. and Archana, B. (2011). An overview on Thin Layer Chromatography, pp.256–267.
3. Lei, T. and Nandi, A.K. (2022). Image Segmentation. John Wiley & Sons.6. Huiyu, Z., Jiahua, W. and Jianguo, Z. (2010). Digital Image Processing: Part II. Bookboon.
4. Pratt, W.K. (2007). Digital image processing : PIKS Scientific inside. Hoboken, N.J.: Wiley-Interscience.

Ольшєвський Сергій Валентинович – доцент кафедри радіотехніки та радіоелектронних систем, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, [e-mail: solaristics@gmail.com](mailto:solaristics@gmail.com)

Кушнір Олександр Анатолійович – аспірант кафедри радіотехніки та радіоелектронних систем, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, [e-mail: xelambert@knu.ua](mailto:xelambert@knu.ua)

Литвиненко Володимир Іванович – професор кафедри інформатики і комп'ютерних наук, Херсонський національний технічний університет, [e-mail: immun56@gmail.com](mailto:immun56@gmail.com)

Куликовський Олександр Павлович – студент кафедри інформатики і комп'ютерних наук, Херсонський національний технічний університет, [e-mail: allskce200@gmail.com](mailto:allskce200@gmail.com)

Serge Olszewski,
Oleksandr Kushnir,
Volodymyr Lytvynenko
Oleksandr Kulykovskyi

RESEARCH OF OPTICAL PROPERTIES OF BIOTISSUES BY PHOTOMETRIC METHODS

Abstract.

As a result of numerical experiments using a Variational Autoencoder (VAE) for segmentation of chromatographic tracks image, it has been shown that such automation enables a fourfold increase in the accuracy of quantitative chemical analysis using thin-layer chromatography.

Keywords: thin-layer chromatography, segmentation, optical sensors

Olszewski Serge – Aspostgraduate student of the Department of Radio Engineering and Radio Electronic Systems, Taras Shevchenko National University of Kyiv, e-mail: solaristics@gmail.com

Kushnir Oleksander – postgraduate student of the Department of Radio Engineering and Radio Electronic Systems, Taras Shevchenko National University of Kyiv, e-mail: xelambert@knu.ua

Lytvynenko Volodymyr – Professor of the Department of Informatics and Computer Science, Kherson National Technical University, e-mail: immun56@gmail.com

Kulikovsky Oleksandr – student of the Department of Informatics and Computer Sciences, Kherson National Technical University [e-mail: allskce200@gmail.com](mailto:allskce200@gmail.com)